

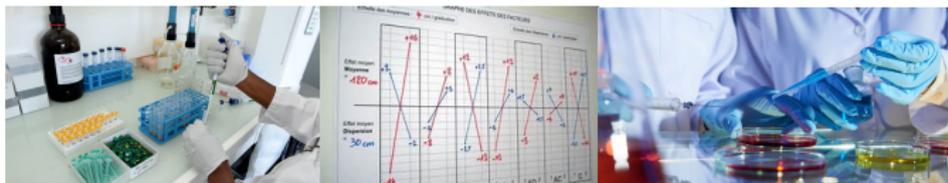
Plans d'expériences

M2 Chimie ICAP Arômes - Parfums - Cosmétiques

Elodie Brunel

Université de Montpellier – Faculté des Sciences

2024-2025



Séance 4 : Etude de cas

Exemple 1 : recette des pancakes

Le but de cette expérience est de trouver la recette de pancakes la plus appréciée. Voici les six variables à deux modalités qui vont être testées :

| Facteur | | Modalité 1 (= +1) | Modalité 2 (= -1) |
|--------------------------|---|--------------------|-------------------------|
| Type de farine | A | Farine blanche T65 | Farine complète T150 |
| Type de sucre | B | Sucre blanc | Sucre muscovado complet |
| Présence de banane | C | Avec banane | Sans banane |
| Présence d'épices | D | Cannelle + Muscade | Sans épices |
| Liant | E | Oœufs | Graines de chia |
| Matière grasse (cuisson) | F | Beurre | Huile de tournesol |

- ▶ Deux pancakes seront réalisés par recette, afin que deux juges testent chacune des recettes. Afin d'éviter de manger des quantités astronomiques de pancakes, seules 8 recettes seront testées.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 1. Combien d'essais sont nécessaires pour construire un plan complet ?

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 1. Combien d'essais sont nécessaires pour construire un plan complet ?

Réponse : Il s'agit d'un plan de 6 facteurs à 2 modalités. Le plan complet nécessite donc $2^6 = 64$ essais.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 2. Donner le plan de base en 8 essais et la matrice des effets de ce plan.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 2. Donner le plan de base en 8 essais et la matrice des effets de ce plan.

Réponse : Il s'agit du plan fractionnaire 2^{6-3} . Le plan de base en 8 essais. Ce plan permet d'estimer les effets suivants :

| | | | | | | | |
|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| I | A | B | C | AB | AC | BC | ABC |
|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|------------|

La matrice des effets de ce plan 2^{6-3} est la suivante :

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 2. Donner le plan de base en 8 essais et la matrice des effets de ce plan.

Réponse : Il s'agit du plan fractionnaire 2^{6-3} . Le plan de base en 8 essais. Ce plan permet d'estimer les effets suivants :

| I | A | B | C | AB | AC | BC | ABC |
|---|---|---|---|----|----|----|-----|
|---|---|---|---|----|----|----|-----|

La matrice des effets de ce plan 2^{6-3} est la suivante :

| I | A | B | C | AB | AC | BC | ABC |
|---|----|----|----|----|----|----|-----|
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 |
| 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 |
| 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 |
| 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 |

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 3. Déterminer les confusions d'effets principaux, d'interactions d'ordre 2 et d'ordre 3 et les générateurs. En déduire la résolution du plan.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 3. Déterminer les confusions d'effets principaux, d'interactions d'ordre 2 et d'ordre 3 et les générateurs. En déduire la résolution du plan.

Réponse :

- ▶ Il faut ajouter 3 facteurs au plan de base pour estimer les 6 effets principaux (**D**, **E** et **F**).
- ▶ Ces facteurs seront confondus avec les interactions d'ordre 2 (ordre d'interaction le plus élevé $-1 : 3-1 = 2$) car plus d'un facteur doit être introduit.
- ▶ Donc **D** sera confondu avec **AB**, **E** avec **AC** et **F** avec **BC**.
- ▶ On peut faire le tableau des confusions des effets principaux, des interactions d'ordre 2 et 3 :

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 3. Déterminer les confusions d'effets principaux, d'interactions d'ordre 2 et d'ordre 3. En déduire la résolution du plan.

Réponse : On peut faire le tableau des confusions des effets principaux, des interactions d'ordre 2 et 3 : On part des confusions :

$$D \sim AB, E \sim AC \text{ et } F \sim BC.$$

| I | A | B | C | D | E | F | ABC |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| ... | ... | ... | ... | AB | AC | BC | ... |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |

Exemple 1 : recette des pancakes

Pour trouver toutes les confusions, on procède méthodiquement :

- ▶ on commence par les interactions d'ordre 2 avec **A** : $AD \sim AAB \sim B$;
 $AE \sim AAE \sim C$; $AF \sim ABC$.
- ▶ puis avec **B** : $BD \dots$; $BE \dots$; $BF \dots$
- ▶ puis avec **C** : $CD \dots$; $CE \dots$; $CF \dots$
- ▶ puis avec **D** : $DE \dots$; $DF \dots$
- ▶ puis avec **E** : $EF \dots$
- ▶ ensuite on passe aux interactions d'ordre 3 avec **AB** : ABD ; ABE ; ABF
- ▶ puis avec **AC** : $ACD \dots$; $ACE \dots$; $ACF \dots$
- ▶ puis avec **AD** : $ADE \dots$; $ADF \dots$
- ▶ puis avec **AE** : $AEF \dots$
- ▶ puis avec **BC** : $BCD \dots$; $BCE \dots$; $BCF \dots$
- ▶ puis avec **BD** : $BDE \dots$; $BDF \dots$
- ▶ puis avec **BE** : $BEF \dots$
- ▶ puis avec **CD** : $CDE \dots$; $CDF \dots$
- ▶ puis avec **CE** : $CEF \dots$
- ▶ puis avec **DE** : $DEF \dots$

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 3. Déterminer les confusions d'effets principaux, d'interactions d'ordre 2 et d'ordre 3. En déduire la résolution du plan.

Réponse : On détermine toutes les confusions (jusqu'à l'ordre 3) :

$$D \sim AB, E \sim AC \text{ et } F \sim BC.$$

| I | A | B | C | D | E | F | ABC |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-------------------|
| ABD | BD | AD | AE | AB | AC | BC | AF |
| ACE | CE | CF | BF | EF | DF | DE | BE |
| BCF | BEF | AEF | ADF | ACF | ABF | ABE | CD |
| DEF | CDF | CDE | BDE | BCE | BCD | ACD | ADE BDF CEF |

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 4. Peut-on estimer quelques interactions d'ordre 2 avec ce plan d'expérience? Si oui, combien et lesquelles? Ecrire l'équation du/des modèles qu'il est possible d'estimer en 8 essais

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 4. Peut-on estimer quelques interactions d'ordre 2 avec ce plan d'expérience? Si oui, combien et lesquelles? Ecrire l'équation du/des modèles qu'il est possible d'estimer en 8 essais

Réponse : 8 essais sont proposés et vont permettre d'estimer 8 paramètres dans le modèle :

- la constante (μ) qui correspond à l
- les 6 effets principaux $\alpha_A, \alpha_B, \alpha_C, \alpha_D, \alpha_E, \alpha_F$ (facteurs A, B, C, D, E, F).
- Il reste un degré de liberté disponible. On peut donc estimer un autre paquet d'effet. Grâce au tableau des confusions, on trouve que l'on peut estimer l'une des interactions AF ou BE ou CD si l'on suppose que les deux autres sont négligeables.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 4. (suite) Ecrire l'équation du/des modèles qu'il est possible d'estimer en 8 essais

Réponse : Avec 8 essais, il est possible d'estimer les 8 coefficients des modèles suivants :

$$Y = \mu + \alpha_A + \alpha_B + \alpha_C + \alpha_D + \alpha_E + \alpha_F + \gamma_{AF} + \varepsilon$$

OU

$$Y = \mu + \alpha_A + \alpha_B + \alpha_C + \alpha_D + \alpha_E + \alpha_F + \gamma_{BE} + \varepsilon$$

OU

$$Y = \mu + \alpha_A + \alpha_B + \alpha_C + \alpha_D + \alpha_E + \alpha_F + \gamma_{CD} + \varepsilon$$

Exemple 1 : recette des pancakes

Aucune interaction d'ordre 2 ne sera estimée dans la suite.

Question 5. Construire le plan 2^{5-2} sous R en utilisant la fonction FrF2 du package FrF2.

Réponse :

```
library(FrF2)
plan <- FrF2(nruns=8, nfactors=6)
summary(plan)
```

```
Experimental design of type FrF2
8 runs
```

```
Factor settings (scale ends):
```

| | Farine | Sucre | Banane | Epices | Liant | Gras |
|---|--------|-----------|--------|--------|-----------------|-----------|
| 1 | T65 | Blanc | Sans | Sans | Graines de chia | Beurre |
| 2 | T150 | Muscovado | Avec | Avec | Oeuf | Tournesol |

```
Design generating information:
```

```
$legend
```

```
[1] A=Farine B=Sucre C=Banane D=Epices E=Liant F=Gras
```

```
$generators
```

Exemple 1 : recette des pancakes

Aucune interaction d'ordre 2 ne sera estimée dans la suite.

Question 5. Construire le plan 2^{5-2} sous R en utilisant la fonction FrF2 du package FrF2.

Réponse : (suite)

The design itself:

| | Farine | Sucre | Banane | Epices | Liant | Gras |
|---|--------|-----------|--------|--------|-------|-----------|
| 1 | T65 | Muscovado | Sans | Sans | Oeuf | Beurre |
| 2 | T65 | Blanc | Sans | Avec | Oeuf | Tournesol |
| 3 | T65 | Muscovado | Avec | Sans | Chia | Tournesol |
| 4 | T150 | Muscovado | Sans | Avec | Chia | Beurre |
| 5 | T65 | Blanc | Avec | Avec | Chia | Beurre |
| 6 | T150 | Blanc | Sans | Sans | Chia | Tournesol |
| 7 | T150 | Blanc | Avec | Sans | Oeuf | Beurre |
| 8 | T150 | Muscovado | Avec | Avec | Oeuf | Tournesol |

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 6. Comment analyser les résultats obtenus ? Voici les expériences réalisées afin de pouvoir analyser les résultats. Le plan d'expérience ainsi que les résultats sont présentés dans le tableau suivant et disponibles dans data.frame `pancake` .

La note correspond à la moyenne de la note des deux juges.

| | Farine | Sucre | Banane | Epices | Liant | Gras | Note |
|---|--------|-----------|--------|--------|-------|-----------|------|
| 1 | T65 | Muscovado | Sans | Sans | Oeuf | Beurre | 4 |
| 2 | T65 | Blanc | Sans | Avec | Oeuf | Tournesol | 5 |
| 3 | T65 | Muscovado | Avec | Sans | Chia | Tournesol | 9 |
| 4 | T150 | Muscovado | Sans | Avec | Chia | Beurre | 6 |
| 5 | T65 | Blanc | Avec | Avec | Chia | Beurre | 10 |
| 6 | T150 | Blanc | Sans | Sans | Chia | Tournesol | 3 |
| 7 | T150 | Blanc | Avec | Sans | Oeuf | Beurre | 8 |
| 8 | T150 | Muscovado | Avec | Avec | Oeuf | Tournesol | 9 |

Réponse : On soumet le code R suivant :

```
model <-lm(Note~Farine+Sucre+Banane+Epices+Liant+Gras, data=pancake)
summary(model)
```

Exemple 1 : recette des pancakes

Voici la sortie R :

Coefficients:

| | Estimate | Std. Error | t value | Pr(> t) |
|-------------|----------|------------|---------|----------|
| (Intercept) | 6.75 | 0.25 | 27 | 0.0236 * |
| Farine1 | -0.25 | 0.25 | -1 | 0.5000 |
| Sucre1 | -0.25 | 0.25 | -1 | 0.5000 |
| Banane1 | 2.25 | 0.25 | 9 | 0.0704 . |
| Epices1 | 0.75 | 0.25 | 3 | 0.2048 |
| Liant1 | 0.25 | 0.25 | 1 | 0.5000 |
| Gras1 | 0.25 | 0.25 | 1 | 0.5000 |

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Il n'y a donc pas d'effet significatif d'aucun des facteurs au seuil de 5 % ($p\text{-value}=0.203$). Cependant, la banane semble être le facteur ayant l'effet le plus important. Avec une $p\text{-value}$ de 0.0704, pas si éloignée de 0.05, on pourrait estimer que l'absence de banane a donc un effet négatif sur l'appréciation des juges.

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 8. Comment aurait-on pu considérer les deux juges ?

Exemple 1 : recette des pancakes

Question 8. Comment aurait-on pu considérer les deux juges ?

Réponse :

Peut-être aurait-on pu considérer le juge comme un 7ème effet. Le plan aurait alors pu comporter 16 essais, chaque essai correspondant à une dégustation, et non plus à une recette.